제5장 1차원 산란과 속박 상태

(One Dimensional Scattering and Bound States)

5.1 확률흐름 밀도와 투과 및 반사계수

(Probability current density and transmission and reflection coefficients)

• 확률밀도와 확률흐름 밀도

우리는 전하가 보존된다는 사실로부터 연속방정식(continuity equation)을 만족함을 알고 있다. 전하밀도(charge density)를 ρ, 전류밀도(current density)를 $\overrightarrow{J}$ 라고 하면 주어진 체적 V 안에 존재하는 전체 전하는 $Q = \int_V \rho dv$ 로 쓸 수 있다. 이러한 전체 전하의 시간변화 $\frac{dQ}{dt}$ 는 주어진 체적 V 를 둘러싸고 있는 경계면 $S(=\partial V)$ 를 통과한 전하흐름과 그 크기는 같고 부호는 반대이므로 우리는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{d}{dt}\int_V \rho dv = -\oint_{S=\partial V} \overrightarrow{J} \cdot \overrightarrow{ds}$$

여기서 오른쪽 항에 발산정리(divergence theorem)를 적용하면 위식은 다음과 같이 되어,

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dv = -\int_V \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J}\, dv \quad ,$$

우리는 연속방정식, $\frac{\partial\rho}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{J} = 0$ 을 얻게 된다.

우리는 앞에서 확률밀도(probability density)가 파동함수로부터 $\psi^*\psi$ 로 주어짐을 배웠다. 또한, 우리는 앞에서 양자역학 체계에서는 항상 유니타리성이 만족되어야 하고 이는 확률보존을 의미함을 보았다. 이는 전하보존의 경우와 마찬가지로 확률밀도에 대한 연속방정식이 성립되어야 함을 의미한다. 그렇다면 위의 전하보존의 경우에서 전하밀도 ρ에 대응하는 전류밀도 $\overrightarrow{J}$ 처럼 확률밀도에 대응하는 확률흐름 밀도(prbobility current density)를 정의할 수 있을 것이다. 이제 우리는 이러한 확률흐름 밀도가 어떻게 정의될 수 있는지 살펴보기로 하겠다. 우리는 앞으로 확률흐름 밀도의 기호로 전류밀도와 같은 $\overrightarrow{J}$ 를 쓰도록 하겠다. 여기서 간편하게 하기 위하여 1차원의 경우를 생각하도록 하자. 그러면, 연속방정식은 다음과 같이 주어진다.

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial J_x}{\partial x} = 0$$

한편 확률밀도는 $\rho = \psi^*\psi$ 이므로 첫 번째 항은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

이제 슈뢰딩거 방정식을 $\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}H\psi$ 로 쓰면, $\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}H\psi^*$ 로 되고, 하밀토니안

H 는 $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ 로 쓸 수 있고 여기서 $V(x)$ 는 실함수이다. 이상을 써서 위식을 다시 쓰면 다음과 같다.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi) = \frac{i}{\hbar}(H\psi^*)\psi - \frac{i}{\hbar}\psi^*(H\psi)$$

여기서 $(H\psi^*)\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2}\psi + V(x)\psi^*\psi,$

$\psi^*(H\psi) = -\psi^*\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + V(x)\psi^*\psi$ 이므로 다음을 얻는다.

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi) &= \frac{i}{\hbar}\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2}\psi + V(x)\psi^*\psi - \left(-\psi^*\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi^*\psi \right) \right\} \\ &= -\frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2}\psi - \psi^*\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) \\ &= -\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\psi - \psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)\end{aligned}$$

한편, 연속방정식은 $\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial J_x}{\partial x}$ 을 만족하므로, 우리는 위식에서 x 성분의 확률흐름 밀도 J_x 가 다음과 같이 주어짐을 알 수 있다.

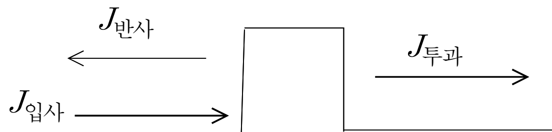
$$J_x = \frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\psi - \psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)$$

이를 3차원으로 확장하면, 다음과 같이 주어진다.

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m}\left\{ (\vec{\nabla}\psi^*)\psi - \psi^*(\vec{\nabla}\psi) \right\}$$

- **투과계수 및 반사계수**

1차원 장벽이 있을 경우, 우리는 대략 [그림5.1]처럼 도식화 할 수 있다.



[그림5.1] 1차원 장벽과 확률흐름 밀도들

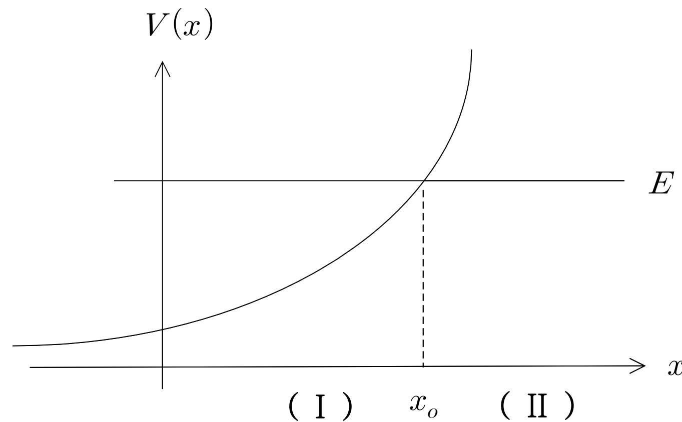
이 경우, 투과계수는 투과한 확률흐름 밀도 $J_{투과}$ 를 입사한 확률흐름 밀도 $J_{입사}$ 로 나눈 값의 절대값으로 주어지며, 반사계수는 장벽에 반사되어 나온 확률흐름 밀도 $J_{반사}$ 를 입사한 확률흐름 밀도 $J_{입사}$ 로 나눈 값의 절대값으로 주어진다.

즉, 투과계수 $T = \left| \frac{J_{투과}}{J_{입사}} \right|$, 반사계수 $R = \left| \frac{J_{반사}}{J_{입사}} \right|$ 로 주어진다. 여기서 주목할 점은 존재확률은 항상 보존되므로 $|J_{입사}| = |J_{투과}| + |J_{반사}|$ 의 관계에 있다. 그러므로 두 계수는 항상 다음의 관계를 만족한다.

$$T + R = 1 \quad .$$

• **운동에너지와 파동함수의 형태**

고전적으로 운동에너지가 음이 되면 그 영역에서 입자는 존재할 수 없다. 즉, 어떤 장벽의 위치에너지가 운동에너지보다 클 경우, 운동에너지가 음이 된 경우라고 할 수 있는데, 이 경우 고전적으로 입자는 그 장벽 안에서 존재할 수 없다. 이는 우리가 너무나 잘 알고 있는 현상이다. 하지만, 양자역학적으로는 입자가 파동성도 동시에 가지고 있고, 파동은 위치에너지가 운동에너지보다 큰 영역도 어느 정도 침투할 수 있는데 이는 전자기 현상에서 전자기파가 물체를 어느 정도 침투함에서도 볼 수 있다. 그렇기 때문에 양자역학적으로는 운동에너지가 음이 되는 경우에도 입자가 존재할 확률이 있게 된다. 그러면 이제 운동에너지가 양과 음의 값을 가질 때 그에 따라 파동함수가 어떤 형태를 갖게 되는지 살펴보기로 하자.
슈뢰딩거 방정식에서 입자의 에너지가 위치에너지보다 큰 경우와 작은 경우로 나누어 생각해 보자.



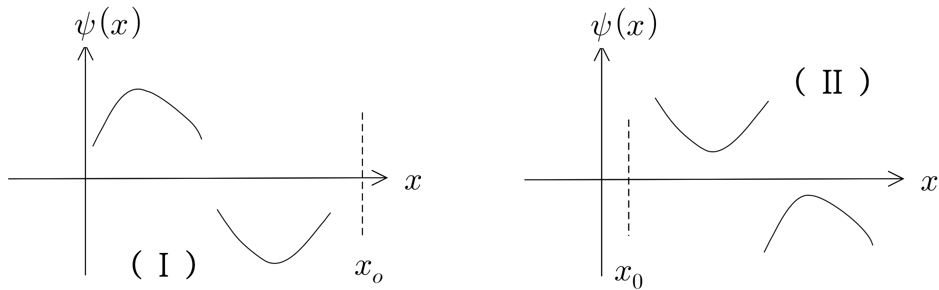
[그림5.2] 위치에너지와 운동에너지의 관계

여기서 우리는 에너지 E 가 위치에너지 $V(x)$ 보다 큰 영역과 작은 영역으로 나뉘어 생각할 수 있겠다. [그림5.2]의 영역 I 에서는 에너지 E 가 위치에너지보다 크므로 운동에너지는 양의 값을 가지며, 영역 II 에서는 위치에너지가 에너지 E 보다 크므로 운동에너지는 음의 값을 갖는다. 즉, 영역 II 는 고전적으로 입자가 존재할 수 없는 영역이 되며, 에너지 E 값이 위치에너지와 같은 지점 x_0 는 운동에너지가 0 이 되어 고전적인 되돌이점(turning point)에 해당한다.
이제 슈뢰딩거의 방정식을 다음과 같이 다시 써보자.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi$$

먼저 영역 I 의 경우에는 파동함수의 값이 양인 경우 파동함수의 2차 미분이 음의 값을 가

져서 위로 볼록하게 되며, 파동함수의 값이 음일 경우 2차 미분이 양의 값을 가져 아래로 볼록하게 된다. 영역 II 의 경우는 파동함수 값이 양인 경우 2차 미분이 양의 값을 가져 아래로 볼록하게 되며, 파동함수의 값이 음인 경우, 그 반대가 되어 위로 볼록하게 된다.



[그림 5.3] 운동에너지와 파동함수의 형태

위 그림은 운동에너지가 양의 값을 갖는 경우 함수가 진동(oscillation)할 수 있음을 보여주며, 음의 값을 갖는 경우 진동할 수 없음을 보여준다. 그리하여 고전적으로 허용되지 않는 영역 II 에서는 함수가 감소하거나 증가할 수밖에 없다. 앞으로 보게 되겠지만, 실제로 고전적으로 허용된 운동에너지가 양의 값을 갖는 영역에서 파동함수는 진동하며(oscillate), 운동에너지의 값이 음이 되는 고전적으로 허용되지 않는 영역에서 파동함수의 크기는 지수함수적으로 감소(exponential decrease)한다.